

Molecular Quantum Chemical—Replaces the Different Conformations of Cyclohexane

Xiaohan Yang

Tianyuan Fungus Industry (Yunnan) Co., Ltd., Kunming, Yunnan, 650000, China

Abstract

The conformations of cyclohexane and different substituted cyclohexane were studied by WebMo software, with the functions of Gaussian HF and 3-21G. The reversal process is rationalized according to their energy (chair type, torsion chair type, torsion ship type, ship type, torsion ship type, chair type).

Keywords

cyclohexane; computer modeling; transition state energy

分子量子化学——取代环己烷的不同构象

杨晓涵

田源菌业(云南)有限公司, 中国·云南昆明 650000

摘要

环己烷和不同取代环己烷构象体的研究采用WebMo软件, 功能为Gaussian HF和3-21G。根据他们的能量合理化了反转过程(椅子型、扭椅型、扭船型、船型、扭船型、椅子型)。

关键词

环己烷; 计算机建模; 过渡态能量

1 引言

计算机建模可用于计算能垒和过渡态能量。此外, 计算建模可以使用复杂的公式代替人工执行一些复杂的计算。通过 WebMo 软件可将量子理论云应用于分析(取代)环己烷的能量和结构。

2 实验方法

2.1 WebMo 软件的应用

WebMo 是构建环己烷和取代环己烷分子并执行所有计算的软件。使用具有 HF/3-21G 理论水平的高斯引擎。构建一个(取代的)环己烷分子, 清理分子以获得适当的构象。Hartree-Fork 与 3-21G 基本基组一起使用以完成计算, 获取每个分子的 RHF 能量, 哈特里为单单位。优化扫描也用于构建分子作业中, 以进一步了解异构化障碍。用(取代的)环己烷对椅子和扭船构象重复计算。因此, 可以获得(取代)环己烷的反转势面^[1]。

2.2 研究(取代)环己烷的能量和结构的必要性

一种环己烷椅子构象到另一种构象的转化对于研究很

有用, 因为在环翻转过程中, 所有轴向取代基都变为赤道位置, 见图 1。在化学合成工业中, 不同位置(轴向和赤道)的取代基可能会影响性质的产品。因此, 了解环己烷构象的化学性质很重要。

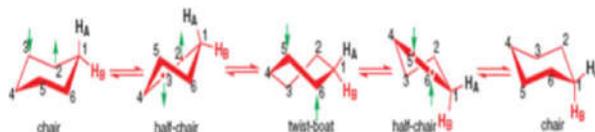


图 1 环己烷转化过程

3 测量结果

3.1 (取代)环己烷的能量

表 1 给出了由 WebMo 计算的(取代的)环己烷在轴向和赤道构象中的 RHF 能量。比较椅子构造器和扭船构造器, 椅子构造器的能量总是较低。当取代基位于赤道位置时, 构象异构体的能量低于轴向取代基构象异构体。因此, 同时满足赤道取代基和椅子构象这两个条件的(取代)环己烷具有最稳定的结构。造成这些能量差异的原因是椅子和赤道位置取代基的氢原子之间的空间位阻较小。排斥力较低, 因此使分子的能量较低。此外, 比较不同(取代)环己烷, 甲氧基环己烷椅子-赤道构象具有最稳定的结构, 能

【作者简介】杨晓涵(1999-), 女, 中国云南昆明人, 在读硕士, 从事化学材料研究。

量 $-910438 \text{ kJ mol}^{-1}$ 。与环己烷相比,添加甲氧基后,分子能量降低了约 100 哈特里。具有取代基甲基的环己烷比具有乙炔基的环己烷更不稳定。取代基越大,(取代的)环己烷就越稳定。这可能是由于形成了更多的共价键,因此需要更多的能量来破坏分子。因此,分子会更稳定。例如,乙炔基团内的碳三键和碳氧键可以在分子中储存更多的能量,使分子比甲基环己烷更稳定。

表 1 (取代)环己烷的能量

分子	RHF 能量(椅子形态) $/ \times 10^5 \text{ kJ mol}^{-1}$	RHF 能量(扭曲变形) $/ \times 10^5 \text{ kJ mol}^{-1}$
环己烷	-6.11523	-6.11495
甲基(轴向)环己烷	-7.13440	-7.13412
甲基(赤道)环己烷	-7.13448	-7.13420
乙炔(轴向)环己烷	-8.09100	-9.09071
乙炔(赤道)环己烷	-8.09101	-8.09072

3.2 (取代)环己烷势面分析

因此得出环己烷反转的势面,见图 2。由于环己烷是对称分子,所以势面图也应该是对称的。

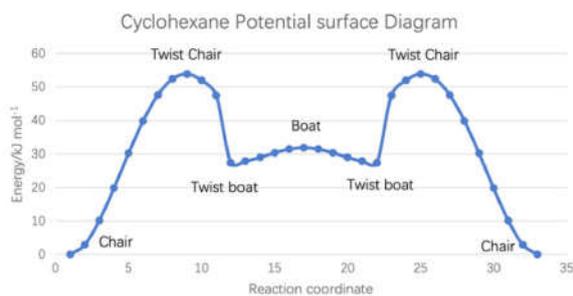


图 2 环己烷势表面能的反转(相对于最低能量最小值的能量)

甲基环己烷从轴向取代到赤道取代势表面能的反演,见图 3。

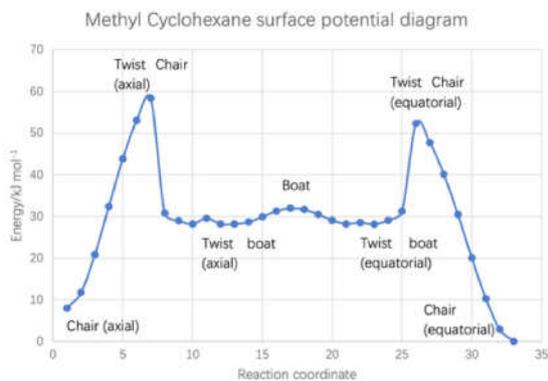


图 3 甲基环己烷从轴向取代到赤道取代势表面能的反演

甲基环己烷和乙炔环己烷转化的势面有相同特征。赤道置换的左半部分低于右半部分(轴向置换)。这意味着当取代基位于赤道位置时,分子的能量略低。如前所述,这是由于氢和赤道构象的取代基之间的阻碍较小所致。因此,应优先考虑赤道取代的环己烷。然而,两种取代环己烷的轴向椅和赤道椅之间的能量差异很小,因此,轴向取代构象也应该存在。在平衡状态下,从轴向到赤道的转移速度应该更快,见图 4。



图 4 平衡中单取代环己烷的倒环

扭船和椅子构象之间所需的活化能最高,因此,速率决定步骤。

此外,在从扭转船(轴向)构象到船构象的转换过程中,两个分子都有一个微小的突起。能量的增加是由于转换过程中取代基团的阻碍。

3.3 测量结果评估

使用高斯 HF 函数和 3-21G 基本基组,计算时可能会出现一些误差,因此图形不是很平滑。为了解决这个问题,可以应用更准确的理论,这可能需要更多的时间才能得到结果。

导致线条不流畅的另一个原因是扫描协调步骤。在扫描过程中使用更多的步骤来获得更多的反应协调,避免图形中的一些急剧变化^[2]。

4 结语

要反转(取代的)环己烷,它遵循以下顺序:椅子,扭椅,扭船,船,扭船,椅子。椅子构造具有最稳定的结构。那么,在椅子到扭椅的转换中,需要最高的活化能,所以它是过渡态扭椅的速率决定步骤。在单取代环己烷的反演中,赤道取代的环己烷比轴向取代的环己烷更有利。这是因为赤道构象的能量略低,因此更稳定。

在未来的研究中,可以使用更准确的理论来确定环己烷在不同构象异构体中的能量。这给出了更准确的结果。工业上也可以采用转化过程,通过应用不同的条件来获得目标产品。

参考文献

- [1] Bruce P.基本有机化学[M].America:波士顿皮尔逊机构,2016.
- [2] Clayden J, Greeves N, Warren S.有机化学[M].2版,U.K.:牛津大学,2012.